

# Применение методов машинного обучения к operando XANES спектроскопии для палладиевых нанокатализаторов

Усольцев Олег Андреевич

Бугаев Арам Лусеенович, Гуда Александр Александрович, Гуда Сергей Александрович

Южный федеральный университет

Солдатов Александр Владимирович

[Oleg-usol@yandex.ru](mailto:Oleg-usol@yandex.ru)

Палладиевые нанокатализаторы играют значительную роль на современном рынке, так как наночастицы Pd используются в широком спектре реакций, таких как гидрирование алкенов и алкинов. Извлечение структурной информации в ходе operando экспериментов по исследованию катализаторов позволяет нам рассматривать различные процессы с новой точки зрения. В частности, спектроскопия тонкой структуры рентгеновского поглощения в околокраевой области (XANES) является мощным инструментом, широко применяемым для определения атомных и электронных свойств, используемых катализаторов [1]. В большинстве случаев анализ XANES данных требует построения теоретических моделей с огромным количеством параметров. Поэтому применение машинного обучения (ML) к in situ и operando XANES спектроскопии открывает новые горизонты для структурной характеристики материалов.

В данной работе мы обсуждаем построение теоретической модели, охватывающей большое количество структурных параметров. Мы исследуем размер частиц, концентрацию углерода и его распределение в объеме и на поверхности частиц палладия, влияющих на свойства К-края XANES спектров палладия. Мы пошагово показали, как улучшается качество подгонки экспериментальных разностных спектров и теоретической модели, принимая во внимание: только межатомные расстояния (рис. 1 светло-серые точки); межатомные расстояния и концентрацию углерода (рис. 1 светло-серый пунктир); расстояния между атомами, концентрации углерода и соотношение объем/поверхность (рис. 1 темно-серые точки). Наконец, мы предложили набор формальных дескрипторов, относящихся к возможному структурному разнообразию, и построили библиотеку теоретических спектров для анализа данных на основе машинного обучения, реализованного в программном пакете PyFitit [2].

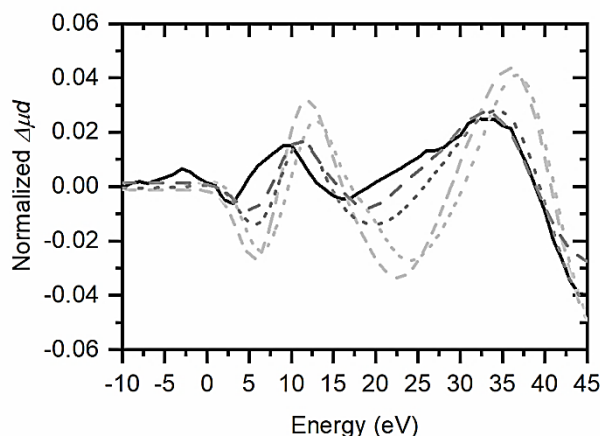


рис.1 Экспериментальный разностный XANES спектр К-края Pd для наночастиц палладия 2,8 нм в ацетилене (сплошная черная линия) и результаты наилучшей подгонки с использованием теоретических спектров только с межатомными расстояниями (светло-серый пунктир); межатомными расстояниями и углеродными примесями в объемной части структуры (светло-серый пунктир) межатомные расстояния, углеродные примеси в объеме и соотношение объем/поверхность (темно-серые точки) в качестве переменных параметров. Лучшая подгонка для алгоритма ML представлена темно-серым пунктиром

Список публикаций:

- [1] Guda, A. A., Guda, S. A., Lomachenko, K. A., Soldatov, M. A., Pankin, I. A., Soldatov, A. V., Braglia, L., Bugaev, A. L.; Martini, A., Signorile, M., Groppo, E., Piovano, A., Borfecchia, E., Lamberti, C // Catal. Today. 2019. in press
- [2] Martini A., Guda S. A., Guda A. A., Smolentsev G., Algasov A., Usoltsev O., Soldatov M. A., Bugaev A., Rusalev Yu., Lamberti C., Soldatov A. V. // Comput. Phys. Commun. 2019. T. 250. C. 107064.